卷(Volume)29,期(Number)1,总(Total)115
页(Pages)25－32,2009,3,(Mar,2009)

矿 物 岩 石
J MINERAL PETROL

石英傅立叶变换漫反射红外光谱在成矿作用研究中的应用

——以山西繁峙义兴寨金矿床为例

罗军燕[1]， 李胜荣[1]， 杨苏明[2]， 徐元柳[1]，
李成禄[1]， 张聚全[1]， 宋继叶[1]

(1. 中国地质大学地质过程与矿产资源国家重点实验室，北京 100083；
2. 中国国土资源航空物探遥感中心，北京 100083)

【摘 要】 作为热液成因矿床中最为主要的贯通性矿物，石英的内部结构和成分在不同成矿阶段会产生系统性变化。石英粉末漫反射红外光谱1 200 cm^{-1}～400 cm^{-1}指纹谱段对此变化较为敏感，可以用来指示不同成矿阶段石英与成矿的关系。研究对山西义兴寨金矿1 070 m中段M0#脉、1#脉，2#脉，3#-4#矿体，M3#脉，950 m和830 m中段的5#脉和6#脉41件不同成矿阶段的石英粉末进行漫反射红外光谱测试，并利用1 070 m中段各矿脉石英粉末光谱特征参数进行矿物学填图。结果表明，非对称伸缩振动谱带1 085 cm^{-1}半高宽值与石英晶格中的类质同像替换浓度有关，类质同像杂质浓度愈高，1 085 cm^{-1}半高宽相对愈大；填图结果指示该值与金品位值的分布对应性较好。对称伸缩振动谱带800 cm^{-1}和780 cm^{-1}的吸收强度与石英所经历的构造差应力呈正相关关系，填图结果表明800 cm^{-1}和780 cm^{-1}吸收强度高值区与金品位高值区的分布几乎趋于一致。红外结晶指数表征石英晶体的结晶程度，随着成矿温度逐渐降低，石英的结晶程度从无序逐渐向有序转化，红外结晶指数也随之减小。

【关键词】 石英；FTIR；漫反射；红外结晶指数；构造差应力；类质同像
中图分类号：O657.33；P578.4+94 **文献标识码**：A
文章编号：1001－6872(2009)01－0025－08

0 引 言

石英作为热液成因矿床，尤其是金矿床中的主要贯通性矿物之一，蕴含着丰富的成矿信息。前苏联学者于20世纪70年代提出了利用石英包裹体中H_2O和CO_2红外光谱的相对光密度值来判定石英脉含金性、成矿期次、矿床成因、形成深度和形成时

收稿日期：2009－01－02； **改回日期**：2009－02－27
基金项目：全国危机矿山接替资源找矿项目(200714009)；高等学校学科创新引智计划(B07011)
作者简介：罗军燕，女，33岁，博士生，矿物学、岩石学、矿床学专业，研究方向：环境与生命矿物学及成因矿物学.

代的方法[1]。我国学者黄振恒[2]也曾提出过利用红外光谱参数进行石英含金性的统计判别方法。上述这些方法曾为我国众多学者所借鉴，用于研究吉林、辽宁、小秦岭、胶东、江西、内蒙、新疆等矿区金矿床石英包裹体中 H_2O 和 CO_2 相对光密度与矿化的关系。研究结果显示，依据石英流体包裹体中 H_2O 和 CO_2 相对光密度的方法来评价一个矿床的含金性、成矿远景及成因是可行的。流体包裹体分析表明，金矿床成矿热液的演化过程中，H_2O 和 CO_2 的富集过程恰好与金的分馏富集过程吻合[2]。富金石英脉（$30\times10^{-6}\sim40\times10^{-6}$）中流体包裹体以富 CO_2 为特征，因而利用石英包裹体中 H_2O，CO_2 透射红外光谱的相对光密度来判定石英脉金矿化程度、矿床规模、矿体剥蚀程度等具有一定的理论依据。

在成矿过程中，石英的变化不仅仅体现在包裹体中 H_2O 和 CO_2 等挥发份的变化上，其成分和结构在不同成矿阶段也具有系统性差异，能否利用石英本身的红外光谱特性进行含金石英脉的评价和预测呢？

研究表明，1 200 cm^{-1}～400 cm^{-1} 之间的谱段正是反映石英成分和结构变化的指纹波谱[3]。石英薄片透射红外光谱在3 400 cm^{-1}～2 000 cm^{-1} 之间具有反映挥发份（H_2O 和 CO_2）含量变化的指纹波谱，而在2 000 cm^{-1} 以下的透射光谱为全吸收（如图1），因此无法分辨出1 200 cm^{-1}～400 cm^{-1} 之间各振动谱带的波谱信息（对 31 件石英样品、107 个包裹体点位的透射光谱测试验证）。然而，漫反射红外光谱却能精确测试出1 085 cm^{-1}，800 cm^{-1}，780 cm^{-1}，695 cm^{-1} 以及 500 cm^{-1}～400 cm^{-1} 之间振动谱带的信息（图 2）。两类红外光谱互为补充可分别从不同侧面揭示石英对成矿过程的指示意义。

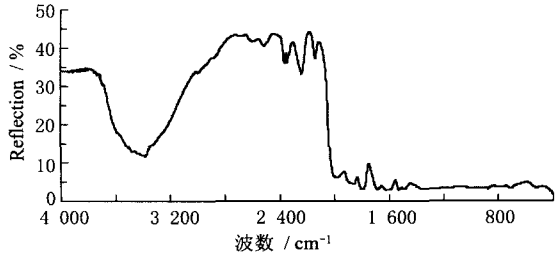


图 1 石英薄片透射红外光谱3 400 cm^{-1}～2 000 cm^{-1} 指纹谱段

Fig. 1 IR transmission spectrum of quartz thin section in 3 400 cm^{-1}～2 000 cm^{-1}

石英脉型金矿是我国金矿最主要的工业类型，研究选择晋东北具有典型代表性的石英脉型金矿床——义兴寨金矿作为研究对象。对该矿床1 070 m 中段 0# 隐脉（下文以 M0# 表示），1# 脉，2# 脉，3#-4# 矿体，3# 隐脉（下文以 M3# 表示），950 m 和 830 m 中段的 5# 脉和 6# 脉 41 件石英粉末样品进行漫反射红外光谱分析，根据石英非对称伸缩振动、对称伸缩振动、红外结晶指数等红外光谱参数，探讨不同成矿阶段石英成分、结构方面的差异及其影响因素，并利用1 085 cm^{-1} 半高宽、800 cm^{-1} 和 780 cm^{-1} 吸收强度作为填图单位进行了矿物学填图，以揭示石英漫反射红外光谱参数与金矿化强度间的联系。

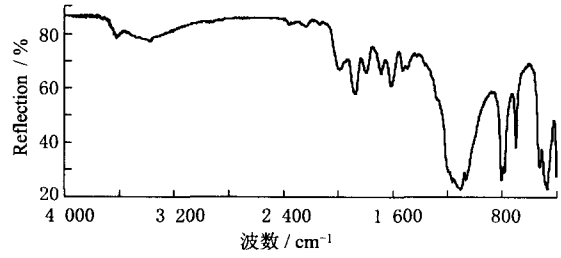


图 2 石英粉末漫反射红外光谱1 200 cm^{-1}～400 cm^{-1} 指纹谱段

Fig. 2 IR diffused spectrum of quartz powder in 1 200 cm^{-1}～400 cm^{-1}

1 研究区地质概况

1.1 地质特征与成矿阶段划分

山西省繁峙县义兴寨金矿床地处山西陆台五台隆起与燕山沉降带接壤处附近（图 3）。该矿床受北西向展布的龙山断裂和义兴寨断裂的控制，形成了十余条近南北向展布的含金石英脉及 4 个在平面上呈菱形分布的隐爆角砾岩筒。叶荣根据充填断裂的含金石英脉中矿石结构构造、矿物组合以及与阶段性构造应力划分为 4 个成矿阶段：黄铁矿-石英阶段、石英-黄铁矿阶段、石英-多金属硫化物阶段和石英-碳酸盐阶段[4]。根据野外观察，黄铁绢英岩化处于红化围岩与多金属矿脉之间，宽约 50 cm，含金量较高，某些矿段甚至作为矿石开采，因此认为该阶段可作为成矿热液早期的产物。

1.2 各成矿阶段石英的产出特征

采样位置分别位于1 070 m 中段 M0# 脉，1# 脉，2# 脉，3#-4# 矿体，M3# 脉，950 m 和 830 m 中段的 5# 脉和 6# 脉（图 4），共计 32 个点位。根据该矿床的成矿阶段划分并结合岩矿石产状、矿物组合和结构构造特点将测试样品石英分为 4 大类分别进行漫反射红外光谱测试。

1.2.1 黄铁绢英岩阶段 此为最早的矿化阶段，黄铁矿呈稀疏浸染状分布于暗黄绿色绢英岩中，石英呈暗灰绿色，他形，粒度一般小于 1 mm。

1.2.2　*黄铁矿-石英(Ⅱ$_1$)或石英-黄铁矿阶段(Ⅱ$_2$)*　黄铁矿由自形、稀疏浸染状转变为他形、稠密浸染状；Ⅱ$_1$ 阶段石英为乳白色、块状或梳状构造，Ⅱ$_2$ 阶段石英为灰白—烟灰色，块状，粒度 5 mm～0.5 mm。石英包裹体均一温度 295 ℃～340 ℃[5]。上述Ⅱ$_1$ 和Ⅱ$_2$ 阶段主要以石英或黄铁矿相对含量的多寡来区分，而在手标本上这两种矿物的含量是渐变的，有时难以严格划分阶段，在实验中将这两个阶段的矿石样品作为同一个阶段进行处理。

1.2.3　*石英-多金属硫化物阶段*　本阶段的显著特点为石英与多种硫化物矿物(黄铁矿、黄铜矿、方铅矿、闪锌矿、毒砂、辉铜矿等)共生，石英呈烟灰色—灰黑色，细脉状或梳状构造，石英包裹体均一温度 180 ℃～250 ℃[5]。多金属硫化物多呈条带状或脉状产出，此阶段最有利于金、银沉淀富集。

1.2.4　*石英-碳酸盐阶段*　该阶段由方解石、石英及少量白云石等呈脉状穿插在早期的矿石中。石英为白色—灰白色，有时呈梳状填充空穴内壁。

2　测试仪器与方法

41 件不同成矿阶段的石英粉末样品漫反射红外光谱测试由美国 Thermalfisher 公司生产的 NICOLET 红外光谱仪及其漫反射附件完成。主要测试参数设置：扫描次数 64，扫描方式“去除水气扰动”，分辨率 4 cm^{-1}，光栏 100，分光气为 KBr，探测器 DTGS，测量背景为纯 KBr 粉末。

上述 41 件石英样品经挑纯后放入玛瑙研钵中研磨至 200 目以上，取耳勺大小石英粉末与 99%纯度的 KBr 粉末充分混合后均匀平铺于样品池内，将测试手柄插入漫反射测试附件中测试。测试所获得的漫反射谱线用随机附带的软件 Omnic7.3 进行解谱分析。

从 41 件石英粉末样中取具有代表性的 11 件样品做 X 粉晶衍射精测晶胞参数，利用日本理学公司 Rigaku 衍射仪进行测试。测试条件：铜靶，40 kV，50 mA，D/max rA，实验数据经 celref 软件程序进行精测晶胞参数计算。

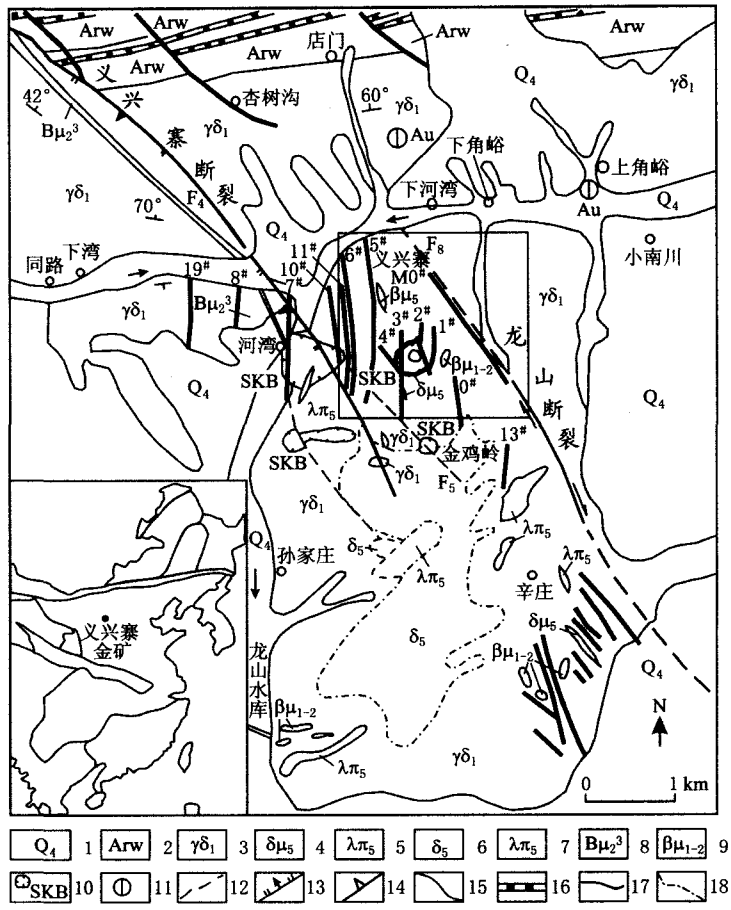


图 3　山西省繁峙县义兴寨金矿矿区地质图(据山西省地矿局 211 地质队，1985)

1. 第四系黄土；2. 五台超群金刚库组；3. 斜长片麻岩夹变粒岩；4. 闪长玢岩脉；5. 似斑状花岗岩；6. 孙庄闪长杂岩体；7. 超浅成相酸性岩；8. 辉绿岩；9. 变基性岩；10. 矽卡岩化隐爆角砾岩筒；11. 金矿点；12. 推测断层；13. 实测断层；14. 产状；15. 含金石英脉及编号；16. 磁铁石英岩；17. 地层界线；18. 推测地层界线

Fig. 3　Geological map of Yixingzhai gold mine, Fanshi County, Shanxi Province

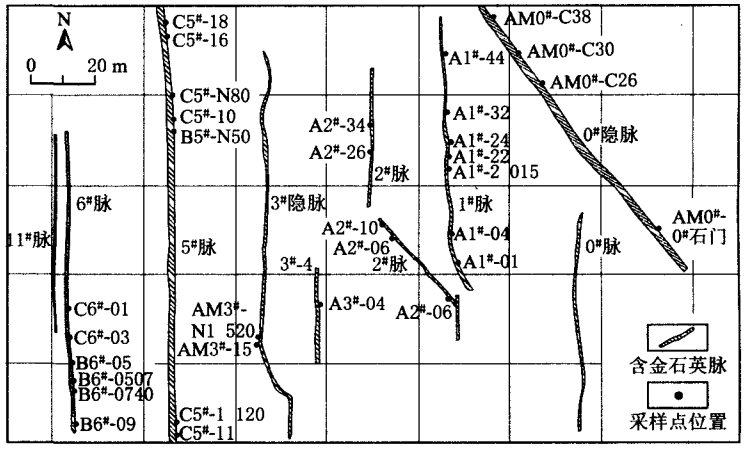


图 4　义兴寨金矿 1 070 m，950 m，830 m 中段含金石英脉水平投影图

A. 1 070 中段；B. 950 中段；C. 830 中段

Fig. 4　Horizontal projection map of auriferous quartz vein in 1 070 m, 950 m, 830 m lever Yixingzhai gold deposit

对不同成矿阶段石英流体包裹体均一温度和黄铁矿包裹体爆裂温度进行测试。石英流体包裹体均一温度利用 Linkam THMSG-600 显微冷热台，测温范围在－196 ℃～＋600 ℃，测量精度为 0.1 ℃ ±，实验严格按照鉴定→冷冻→加热的流程进行。黄铁矿包裹体爆裂温度利用矿物包裹体爆裂法测温，使用仪器为 DT-50 型，测温精度±2 ℃。

3 实验结果及矿物学填图

在 41 件不同成矿阶段的石英粉末样品测得的 81 条漫反射红外光谱曲线中取 A1#-44-I，A1#-04-Ⅱ，A3#-04-Ⅲ和 A2#-03-Ⅳ分别作为黄铁绢英岩阶段、石英-黄铁矿或黄铁矿-石英阶段、石英-多金属阶段和石英-碳酸盐阶段之代表(图 5)。从图 5 中不难看出各成矿阶段在①～④特征区域分别具有如下特点：

(1)1 200 cm^{-1}～1 000 cm^{-1}为最强吸收谱带，谱形宽阔，形似“W”(图 5①区)。主吸收峰位于 1 085 cm^{-1}，其左右两边各有一个小而尖锐的吸收峰，一般位于1 160 cm^{-1}和1 060 cm^{-1}附近。不同成矿阶段的石英粉末样品在该吸收带位置的谱形会略微有所变化，如：黄铁绢英岩阶段(图 5 中 A1#-44-I)的1 085 cm^{-1}左侧小吸收峰退化，其退化原因尚待进一步研究。

(2)800 cm^{-1}～600 cm^{-1}吸收谱带分别由一个分裂锐锋和单一锐峰组成(图 5②区)。其中分裂锐峰状似蟹钳，分别对应 800 cm^{-1}和 780 cm^{-1}处，且一般高频峰强度大于低频峰。实验表明该谱带吸收峰谱形和位置比较稳定。

(3)500 cm^{-1}～400 cm^{-1}吸收谱带，其中 513 cm^{-1}吸收强度较弱，460 cm^{-1}为整条谱线的次强吸收谱带，其吸收谱形和位置也比较稳定(图 5③区)。

(4)由于石英样品中含有相当量的分子水(H_2O)，且稀释剂 KBr 中也不可避免的含有微量吸附水，这些物质在3 200 cm^{-1}～3 600 cm^{-1}都有特征显著的吸收谱带[6](图 5④区)，但以石英中 H_2O 分子的振动效应为主[7]。

(5)个别样品在3 600 cm^{-1}附近明显可见 OH^- 吸收峰(图 5 中 A1#-44-I)，这表明石英样品的纯度不够，其中还含有少量其他类型的硅酸盐。因此，这意味着利用石英粉末进行红外光谱漫反射实验时需要用纯度较高的石英样品，以避免其他矿物的干扰。

对上述 41 件石英粉末漫反射红外光谱曲线进行解谱分析，得到如下解谱参数：1 085 cm^{-1}半高宽、800 cm^{-1}和 780 cm^{-1}吸收强度值，利用这 3 个参数结合义兴寨金矿区1 070 m 中段 M0# 脉，1# 脉，2# 脉金品位(图 6a)分布，进行矿物学填图(图 6b～d)。

4 讨 论

4.1 石英红外结晶指数及其成矿学意义

红外结晶指数(K)指石英形成时受温度、压力

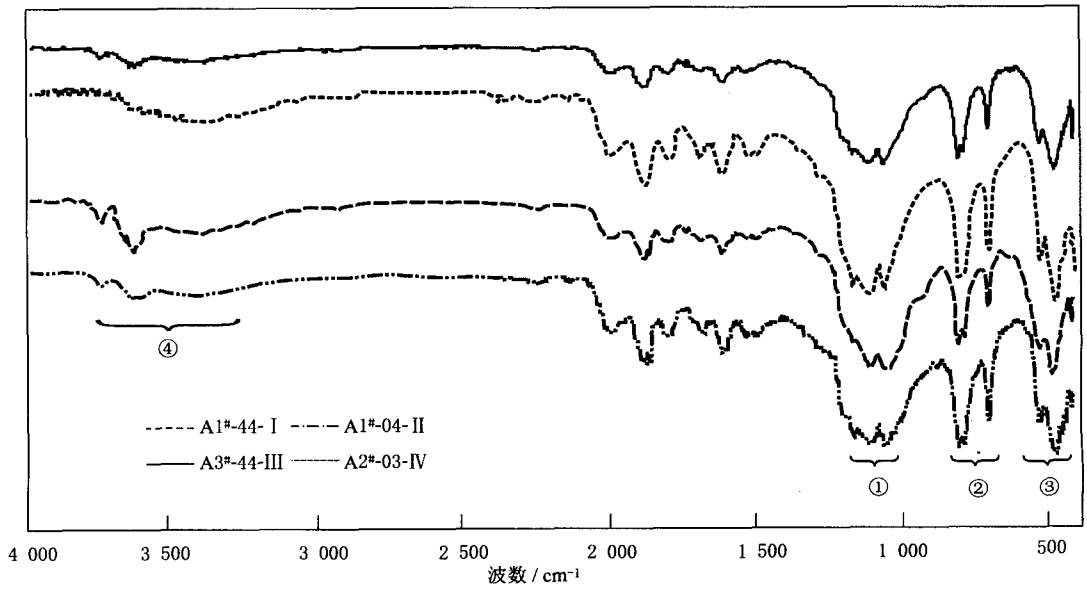


图 5 各成矿阶段石英粉末漫反射红外光谱曲线

Ⅰ. 黄铁绢英岩阶段；Ⅱ. 黄铁矿-石英或石英-黄铁矿阶段；Ⅲ. 石英-多金属硫化物阶段；Ⅳ. 石英-碳酸盐阶段(注：为清晰显示各成矿阶段谱线特点，对谱线进行了相对平移)

Fig. 5 FTIR diffusion reflection spectrums of the quartz powder of different mineralization stages

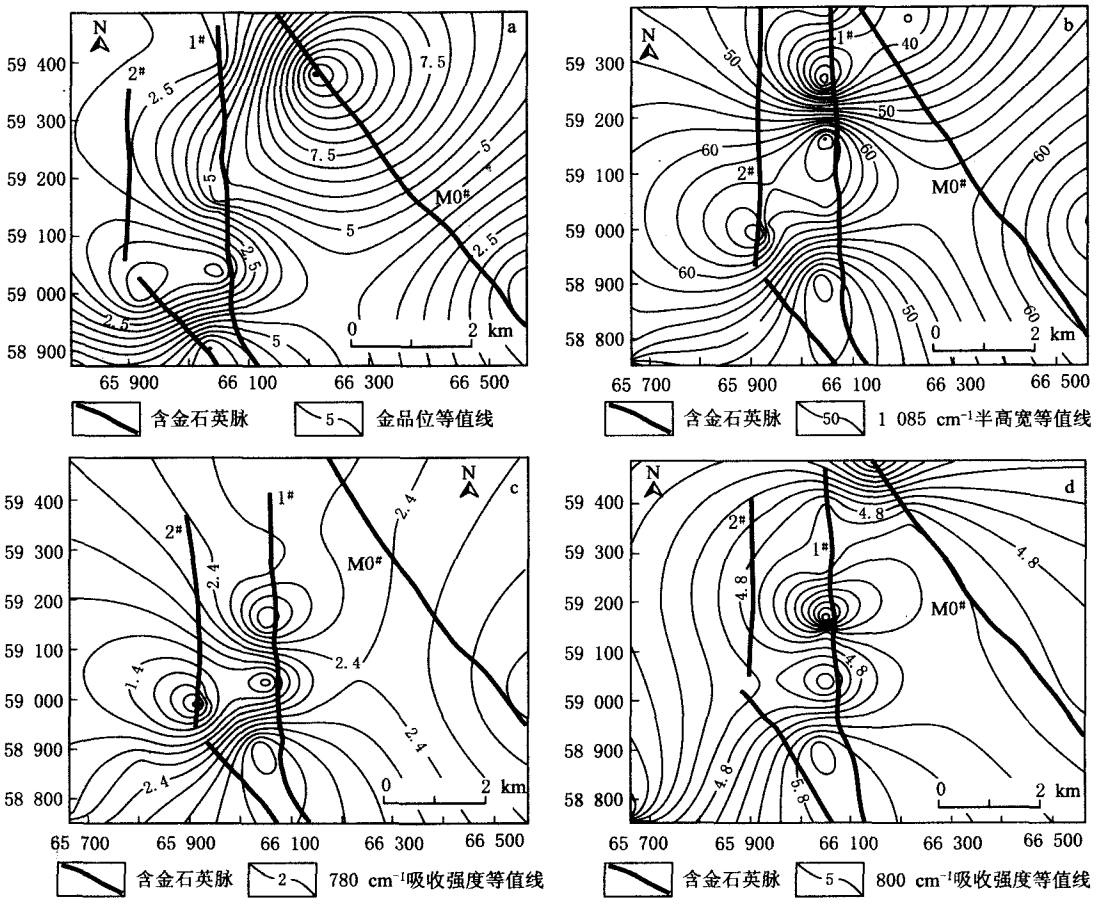


图 6　义兴寨金矿 1 070 m 中段石英含金性及其粉末漫反射红外光谱参数等值线图

a. 石英脉含金性等值线图；b. 1 085 cm^{-1}半高宽等值线图；c. 780 cm^{-1}吸收强度等值线图；d. 800 cm^{-1}吸收强度等值线图

Fig. 6　Mineralogical mapping with FTIR diffusion reflection spectrum parameters of quartz powder on the 1 070 level, Yixingzhai gold deposit

和时间等多种因素影响造成石英内部晶格质点偏离理想晶体格子构造的程度。其计算公式表达为：

$$K = 10Q(b_{780} - b_{min})/b_{780} \quad (1)$$

式中：Q. 经验指数，$Q \approx 2.9$；b_{780}. 780 cm^{-1}的吸收峰深度；b_{min}. 780 cm^{-1}及 800 cm^{-1}带叠加区的最小深度(图 7)。

800 cm^{-1}和 780 cm^{-1}为石英最典型的红外漫反射吸收峰，其尖锐程度能够反映石英的结晶程度，即：吸收峰谱形越尖锐、石英结晶程度越好、红外结晶指数值 K 越小；反之，则红外结晶指数 K 越大[8]。实验表明，黄铁绢英岩阶段石英的红外结晶指数 K 主要集中在 2.935～7.958、均值 5.050 8；石英-黄铁矿或黄铁矿-石英阶段红外结晶指数主要集中在 2.00～7.028 之间、均值为3.090 9；石英-多金属硫化物阶段红外结晶指数主要集中在2.270 4～4.761 6、均值3.108 2(表 1)，即石英-多金属硫化物阶段和石英-黄铁矿或黄铁矿-石英阶段的石英结晶程度好于黄铁绢英岩阶段。石英流体包裹体均一温度和黄铁矿爆裂温度测试均表明，黄铁绢英岩阶段成矿温度分别为 338 ℃，331 ℃(表 1)，此时形成石英的质点由于高温效应无序程度较高，这使更多的杂质易于混入石英晶格而造成晶格畸变，造成石英晶体内部质点排列无序程度增加；精修晶胞参数显示该阶段石英的单位晶胞 a 轴平均长度为

表 1　义兴寨金矿石英晶胞参数、均一温度及黄铁矿爆裂温度

Table 1　Cell parameters and homogeneous temperatures of quartz and explosive temperature of pyrite, Yixingzhai gold deposit

成矿阶段	红外结晶指数	非对称伸缩振动 1 085 cm^{-1} 半高宽/%	晶胞参数			石英均一温度/℃	黄铁矿爆裂温度/℃
			a/nm	c/nm	V/nm^3		
Ⅰ	5.050 8(11)	67.817 3(11)	4.919 7(1)	5.408 3	113.36	338	331
Ⅱ	3.090 9(22)	58.348 4(22)	4.913 8(7)	5.406 8	113.06	250～310	302
Ⅲ	3.108 2(7)	43.946 5(7)	4.913 9(3)	5.408 5	113.11	180～230	306

注：Ⅰ. 黄铁绢英岩阶段；Ⅱ. 黄铁矿-石英或石英-黄铁矿阶段；Ⅲ. 石英-多金属硫化物阶段；括号内为样本个数

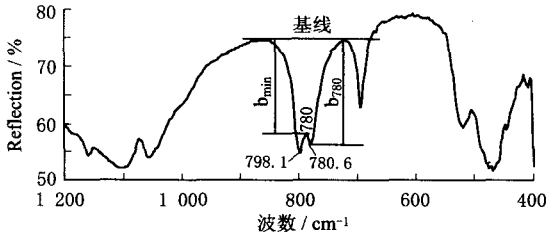


图 7 石英红外结晶指数示意图[8]

Fig. 7 The schematic diagram of quartz IR crystallization index[8]

0.491 97 nm,晶胞体积 V 平均达到0.113 36 nm^3,分别比理想晶胞的 a_0(0.491 6 nm)和 V_0(0.113 13 nm^3)增大了 0.08%和 0.2%,在整个热液成矿期此阶段的晶胞偏离理想晶胞参数值最多。随着成矿温度的降低,石英晶出速率变缓,自形程度较前期有所增强,因此当处于黄铁矿-石英或石英-黄铁矿阶段和石英-多金属硫化物阶段时,石英红外结晶指数值逐渐降低。

4.2 石英非对称伸缩振动 1 085 cm^{-1} 半高宽的成矿学意义

双原子基团化学键的振动可以视为简谐振动,根据胡克定律,其振动频率(v)是化学键力常数(k)和 A,B 两原子的质量(m_A 和 m_B)的函数(②式)。多原子基团的每个化学键也可以近似地看成是一个谐振子,②式中的 k 与 m_A 和 m_B 分别代表相连两原子间的化学键力常数和两原子的质量[7]。前人研究表明[8],石英 FTIR 漫反射红外光谱 Si—O—Si 或 Si—O—(Al)非对称伸缩振动吸收带位于1 085 cm^{-1}。

$$v=\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k(m_A\cdot m_B)}{m_A+m_B}} \qquad (2)$$

式中:v. 石英吸收红外光能量而产生吸收谱带的频率/($s\cdot cm^{-1}$);m_A,m_B. 两个原子的质量/g;k. 化学键力常数/($N\cdot cm^{-1}$)。

自然界中矿物晶格内部不可避免地存在以类质同象形式出现的点缺陷,正是这些点缺陷蕴含了丰富的成因信息[9]。例如:在石英形成过程中,Al^{3+},Fe^{3+}等离子替代晶格中 Si^{4+} 的同时将带入碱金属离子(K^+,Na^+)作为电荷补偿以维持晶胞的电价平衡,造成原晶胞体积增大。经石英粉末红外光谱实验和热力学推导[10],随石英形成温度的降低其晶格内部类质同象杂质减少,1 085 cm^{-1} 吸收谱位向高频方向迁移极为明显,且1 085 cm^{-1} 半高宽逐渐变小;相反地,石英的形成温度愈高,类质同象杂质浓度愈高,1 085 cm^{-1} 半高宽逐渐变大。从表 1 可以看出,随着义兴寨金矿成矿作用的进行,从早阶段到晚阶段温度逐渐降低,同红外结晶指数的变化规律一致,石英的结晶程度从无序渐变为有序,1 085 cm^{-1} 半高宽值逐渐减小。

利用1 085 cm^{-1} 半高宽值在义兴寨金矿1 070 m 中段进行矿物学填图显示(图 6b):金品位较高的 M0# 脉和 1# 脉1 085 cm^{-1} 半高宽值较小,金品位值较低的 2# 脉1 085 cm^{-1} 半高宽值较大。

4.3 石英对称伸缩振动吸收强度的成矿学意义

石英粉末漫反射红外光谱 800 cm^{-1} 和 780 cm^{-1} 都属于 Si—O—Si 对称伸缩振动。颜文等[11]认为石英粉末对称伸缩振动吸收谱带的强度与石英所经历的构造应力作用强度有关。叶荣[4]分析了义兴寨金矿床各成矿阶段石英所经历的构造差应力(图 8),每个成矿阶段均表现出构造应力在前期集中强烈释放和后继平稳缓慢释放的性质,且随着矿化强度变化释放的应力强度也逐渐减弱。石英 FT-IR 漫反射红外光谱对称伸缩振动的吸收强度正好与此相对应。对称伸缩振动谱带 800 cm^{-1} 和 780 cm^{-1} 吸收强度值较大的石英-多金属硫化物阶段和黄铁矿-石英或石英-黄铁矿阶段(图 9),其相应的构造差应力值也较大,这表明石英所经历的构造差应

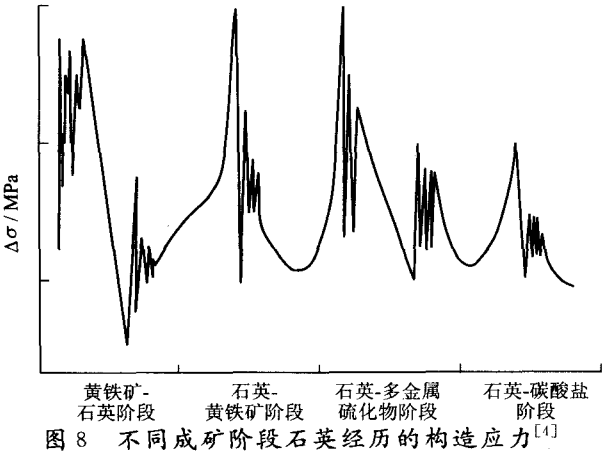


图 8 不同成矿阶段石英经历的构造应力[4]

Fig. 8 Tectonic stress suffered by quartz of different mineralization stages[4]

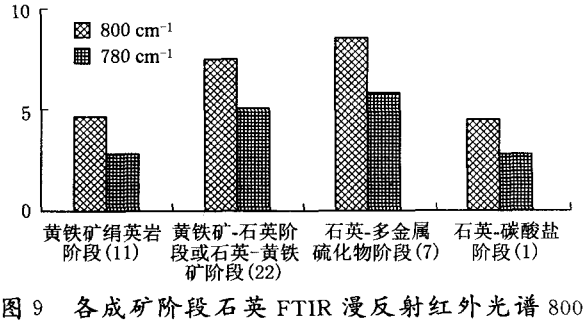


图 9 各成矿阶段石英 FTIR 漫反射红外光谱 800 cm^{-1},780 cm^{-1} 吸收强度

Fig. 9 The 800 cm^{-1} and 780 cm^{-1} absorption intensity of quartz FTIR diffusion reflection spectrums of different mineralization stages

力与其漫反射红外光谱的对称伸缩振动之间存在某种联系，即石英对称伸缩振动谱带 800 cm^{-1} 和 780 cm^{-1} 的吸收强度随矿化强度同步增大——石英-多金属硫化物阶段最大，其次为黄铁矿-石英或石英-黄铁矿阶段，再次为黄铁绢英岩阶段，最后为石英-碳酸盐阶段（表 2）。

表 2　义兴寨金矿石英 FTIR 漫反射红外光谱特征参数、构造差应力值

Table 2　The FTIR diffusion reflection characteristic parameters and tectonic stress of quartz in different mineralization stages, Yixingzhai gold deposit

成矿阶段	对称伸缩振动吸收强度/%		构造差应力均值[4]
	800 cm^{-1}	780 cm^{-1}	
Ⅰ	4.741(11)	2.812	/
Ⅱ	7.625(22)	5.136	66.575
Ⅲ	8.610(7)	5.829	67.950
Ⅳ	4.543(1)	2.776	54.40

注：Ⅰ. 黄铁绢英岩阶段；Ⅱ. 黄铁矿-石英或石英-黄铁矿阶段；Ⅲ. 石英-多金属硫化物阶段；Ⅳ. 石英-碳酸盐阶段；括号内为样本个数

成矿过程中构造应力的增强有利于成矿物质中类质同象和其他缺陷的发生，这就相应地增加了各种矿质元素进入晶格的几率，同时，大规模构造应力的增强在特定位置造成容矿空间的增加，对于流体的物理化学条件转变也具有促进作用，这些均是导致金沉淀的有利因素。这些变化在石英粉末漫反射红外光谱上不仅表现在前述的1 085 cm^{-1} 半高宽的变化上，在 800 cm^{-1} 和 780 cm^{-1} 的吸收强度亦有所表现在1 070 m 中段石英含金性及其粉末漫反射红外光谱参数等值线图（图 6c～d）中，780 cm^{-1} 和 800 cm^{-1} 吸收强度高值区与金品位高值区分布趋于一致。

石英晶体的基本组成单位是由[SiO_4]组成的正四面体，当晶体不受外力作用时，[SiO_4]四面体中正负电荷的重心重合，偶极矩为零。成矿作用过程中由于构造应力作用引发石英分子中正负电荷的中心偏离而产生偶极矩，使得石英由非极性四面体转变为极性四面体。随着矿化强度增大，石英所经历的构造差应力增强、类质同象替换发生的频率相应增多，石英由原来的非极性四面体变化为极性四面体的几率也显著增多，极性也随之增强。计算和实验表明：化学键的极性越强则对称伸缩振动的强度就越大[9]。因此构造差应力强、类质同象替换越普遍，石英[SiO_4]四面体极性越强，由此而产生的对称伸缩振动的强度亦越大。这正是金品位高值区与石英粉末漫反射红外光谱 800 cm^{-1} 和 780 cm^{-1} 吸收强度高值区趋于一致的内在原因。

5　结　论

石英的薄片透射吸收光谱和粉末漫反射红外光谱分别从不同侧面反映了石英于矿化的关系，二者互为补充。前者利用石英包裹体中 H_2O 和 CO_2 相对光密度反映石英与成矿的关系，后者则从不同成矿阶段石英的结构和成分系统性变化揭示石英与矿化强度的关系。研究利用义兴寨金矿床石英粉末的漫反射红外光谱，从整体谱形、特征吸收峰强度、红外结晶指数以及光谱参数填图等角度分析了石英傅立叶变换漫反射光谱参数在成矿作用中的意义，主要结论如下：

5.1　石英红外结晶指数表征石英结晶程度，石英结晶程度越好其值越小；反之，红外结晶指数值越大。

5.2　非对称伸缩振动谱带1 085 cm^{-1} 半高宽值与石英晶格中的类质同象替换有关，类质同象杂质浓度愈高，1 085 cm^{-1} 半高宽相对愈大；矿物学填图表明石英 FTIR 漫反射红外光谱1 085 cm^{-1} 半高宽值与金品位值对应性较好。

5.3　石英 FTIR 漫反射红外光谱 800 cm^{-1}，780 cm^{-1} 吸收强度与其所经历的构造差应力呈正相关关系。矿物学填图表明随着矿化强度的增强 800 cm^{-1}，780 cm^{-1} 吸收强度同步增强。

综上所述，石英 FTIR 漫反射红外光谱对成矿过程中石英的变化具有重要的指示作用，是矿物红外光谱应用的补充和发展。虽然本文仅以石英为研究对象，但是对于其他与成矿作用关系密切的矿物，本文的分析方法亦具有应用价值。

致谢　感谢中国国土资源航空物探遥感中心王润生教授、中国地质大学（北京）申俊峰教授在成文过程中给予的悉心指点，感谢中国地质大学（北京）张秀宝工程师在实验过程中的耐心帮助。

参考文献

[1]　张保民. 红外光谱方法在找金中的应用综述[J]. **地质科技情报**，1994，13(4)：98-102.

[2]　黄振恒. 湖南两金矿石英含金性红外光谱判别[J]. **矿物岩石**，1990，10(4)：89-96.

[3]　Etchepare J，Merian M，Smetankine L. Vibrational normal modes of SiO_2 I α and β quartz[J]. **Materials Chemistry and Physics**，60：1 873-1 876.

[4]　叶　荣，赵伦山，沈镛立，等. 义兴寨金矿成矿作用地质地球化学动力学研究[J]. **现代地质**，1997，(11)1：58-65.

[5] 李双保,李俊健.山西恒山义兴寨脉金矿田成矿地球化学特征[J].**前寒武纪研究进展**,1997,20(2):1-21.
[6] V C 法默.**矿物的红外光谱**[M].北京:科学出版社,1982.
[7] 颜 文,龙江平.海南二甲金矿石英粉末红外光谱特征及其理论分析[J].**贵州工学院学报**,1993,22(4):1-7.
[8] 闻 铬.**矿物红外光谱学**[M].重庆:重庆大学出版社,1989,1-190.
[9] 蒋先明.**简明红外光谱识谱法**[M].南宁:广西师范大学出版社,1992,1-25.
[10] 李和平,张振儒,陈梦熊.矿物类质同象的红外光谱研究[J].**桂林冶金地质学院学报**,1994,14(1):31-40.
[11] 颜 文,杨元根.海南二甲金矿糜棱岩(石英)含矿性的构造动力分析及谱学评价[J].**地质找矿论丛**,1993,8(9):28-41.

THE SIGNIFICANCE OF PARAMETERS OF FOURIER TRANSFORM INFRA RED DIFFUSED SPECTRUM IN MINERALIZATION

LUO Jun-yan[1], LI Sheng-rong[1], YANG Su-ming[2],
XU Yuan-liu[1], LI Cheng-lu[1], ZHANG Ju-quan[1], SONG Ji-ye[1]

1. *State Key Laboratory of Geological Processes and Mineral Resources, China University of Geosciences, Beijing* 100083, *China*;
2. *China Aero Geophysical Survey & Remote Sensing Center for Land and Resources (AGRS), Beijing* 100083, *China*;

Abstract: As a most important mineral of hydrothermal deposit, quartz varied systematically in internal structure and composition at different mineralization stages. FTIR diffused reflection is sensitive to the systematic variations. In this study, 41 pieces of quartz powder from 1 070 m level are used for FTIR measurement and the spectral parameters for mineralization mapping are exploited. It is indicate that the absorption intensity of 800 cm^{-1} and 780 cm^{-1}, and the locations of symmetric stretching vibration, are positively correlated to the tectonic stress, which is also reflected in the mineralization mapping. Due to isomorphism displacement in the quartz, the values of 1085 cm half width is correlated with the gold grade distribution of quartz vein. IR crystallization index represents degree of crystallization of quartz. With the decrease of metallogenic temperature, the quartz crystallizes in an ordered way gradually and the IR crystallization index is also decreased.

Key words: quartz; FTIR; diffused reflection; IR crystallization index; tectonic stress; isomorphism

ISSN 1001-6872(2009)01-0025-08; CODEN:KUYAE2

Synopsis of the first author: Luo Junyan, female, 33 years old, a doctoral student of mineralogy, petrology & economic deposit. Now she is engaged in the research of environmental & vital mineralogy and genetic mineralogy.